



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2018/2019

Nº de proyecto 274

**Página web orientada a la evaluación “*in silico*” de
nuevas sustancias con interés biológico**

Responsable del Proyecto;

Alejandro Romero Martínez

Facultad de Veterinaria

Departamento de Farmacología y Toxicología

1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

El principal objetivo que nos planteamos fue proporcionar a los alumnos, tanto de Grado como de Master, un entorno multilingüe de aprendizaje virtual adaptativo donde poner en práctica los conocimientos de toxicología adquiridos en las clases teóricas complementando e incrementando así el conocimiento aplicado. Y que los alumnos de diversas nacionalidades puedan adquirir experiencia práctica en el manejo de datos toxicológicos y herramientas virtuales que cada día están más presentes en la vida profesional, llevando a cabo procedimientos experimentales predictivos y evaluaciones toxicológicas “*in silico*” con herramientas reales.

Para ello ampliamos la página web “INSILITOX”, ofreciendo un entorno internacional y más completo, englobando nuevos enlaces a herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos *on-line*. La experiencia de los profesores que participan en el proyecto trabajando con estas herramientas online es fundamental para el desarrollo del proyecto en este punto. Y de esta manera, responder a la necesidad de un entorno que englobe las numerosas herramientas a las que se puede acceder y que además adquiera un valor añadido ya que añadiremos tutoriales o textos explicativos para su comprensión y utilización.

Con todo ello, lo que tratamos es que cualquier alumno ya sea nacional o internacional pueda aprender, no solo a cómo usar e interpretar los datos, sino también a la aplicación potencial de dichos datos obtenidos a través de los sistemas *in silico*.

2. Objetivos alcanzados

Globalmente, el objetivo inicial planteado ha sido alcanzado. Se ha rediseñado el entorno web donde se engloban enlaces de herramientas validadas para realizar análisis toxicológicos *on-line*. “<https://www.velixea.com/en/insilitox/>”

La web “INSILITOX” se ha reestructurado como una interfaz multilingüe donde se encuentran recopilados los enlaces a las mencionadas herramientas, y además cuenta con textos e imágenes donde se explica en ambos idiomas, detalladamente en qué consisten estas herramientas determinando así su utilidad.

Todas las herramientas a las que se hace referencia son de reconocido prestigio en el ámbito científico, conjuntamente suponen la creación de un entorno que facilita el acceso directo a las principales herramientas a las que se puede acceder gratuitamente y que además consta de un valor añadido con tutoriales y textos explicativos para su comprensión y utilización.

La experiencia de los miembros que participan en el proyecto trabajando con estas herramientas *on-line* ha sido fundamental para el desarrollo del proyecto. Ha facilitado que los alumnos puedan manejar datos toxicológicos, con aplicación tanto real como potencial a través de los sistemas *in silico*.

Además, hemos tenido la oportunidad de participar en foros internacionales de educación superior donde se ha divulgado la experiencia.

Los objetivos planteados al inicio del proyecto han sido suficientemente alcanzados y nos sirven como punto de partida para seguir evolucionando la web ofreciendo un entorno cada vez más amplio y completo. Lo que repercute directamente en el aprendizaje de los alumnos.

3. Metodología empleada en el proyecto

Se han realizado reuniones de los miembros del equipo para la puesta en común de las herramientas más importantes a incluir en la web y para definir el grado de implicación específico de cada miembro del proyecto.

Se ha rediseñado una página web intuitiva y multilingüe, donde se recopilan las más importantes herramientas, validadas por las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Se han elaborado en varios idiomas una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en la web.

Finalmente, el resultado se ha divulgado en el Congreso de Educación Internacional INTED 2019 (13th International Technology, Education and Development Conference). "*Learning toxicology on line*" ISBN: 978-84-09-08619-1.

4. Recursos humanos

El grupo está formado por un equipo de trabajo interdisciplinar consolidado en el ámbito de la toxicología, las evaluaciones *in silico* y la creación de entornos web.

La totalidad del equipo ha sido esencial en el desarrollo del proyecto conforme al plan de trabajo presentado.

Los miembros del equipo poseen numerosas evaluaciones positivas y excelentes del Programa Docente de la UCM, proyectos de innovación docente, publicaciones y contribuciones docentes lo cual demuestra la relevante trayectoria en innovación docente del grupo.

5. Desarrollo de las actividades

En las primeras reuniones mantenidas entre los miembros del equipo para la puesta en común de aquellas herramientas que tenían mayor relevancia e interés para los estudiantes e investigadores se definieron las que consideramos más importantes para la evaluación de la toxicidad de nuevas sustancias de interés biológico a incluir en la web. En esta reunión también se definieron las actividades específicas de cada miembro del proyecto.

Posteriormente se ha procedido a elaborar una página web intuitiva, donde hemos recopilado las más importantes herramientas, que además cuentan con el respaldo y la validación de las principales autoridades reguladoras como la OCDE, ECVAM, EPA ...

Dentro de cada una de ellas hemos incluido una serie de tutoriales de contenido específico para facilitar la comprensión de las distintas evaluaciones que se abordan en las distintas herramientas recopiladas.

Esta página se ha alojado en la Sección de Toxicología de la página web del Departamento para ofrecer una fácil accesibilidad tanto a los alumnos como a investigadores interesados en este campo.

Finalmente, los resultados se han divulgado en foros y congresos de educación internacionales como INTED.

6. Anexo (capturas de la página web)

En este apartado se incluyen capturas de pantalla extraídas de la página web.



The screenshot shows the top section of the VELIXea website. The header includes the VELIXea logo on the left and a navigation menu on the right with links: home, our services, work with us, contact us, vlx connect, Insilitox, and flags for the UK and Spain. Below the header is a large banner image featuring laboratory glassware like flasks and test tubes. The main heading in the banner is "Bienvenidos a INSILITOX" in blue, with the subtitle "Web orientada a la toxicología IN SILICO" below it. A play button icon is centered in the banner. Below the banner, the text "INSILITOX - ON LINE ANALYSIS" is displayed. At the bottom, there are four logos arranged in a 2x2 grid: COSMOS (Cosmetics Safety), ToxBank (Compound Testing), in silico toxicology gmbh (Structure-Activity Relationship), and the United States Environmental Protection Agency logo (Chemical Screening).

VELIXea

home our services work with us contact us vlx connect Insilitox

Bienvenidos a INSILITOX

Web orientada a la toxicología IN SILICO

INSILITOX - ON LINE ANALYSIS

COSMOS

Cosmetics Safety

ToxBank

Compound Testing

in silico toxicology gmbh

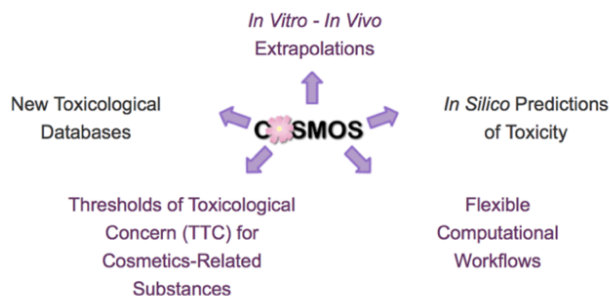
Structure-Activity Relationship

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY

Chemical Screening



The main aim of COSMOS was to develop freely available tools and workflows to predict the safety to humans following the use of cosmetic ingredients.

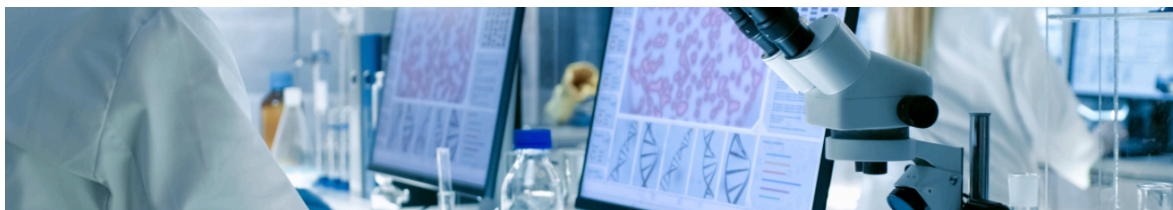


- ToxBank provides a dedicated data warehouse for toxicity data management and modelling, a «gold standards» compound database and repository of selected test compounds, and a reference resource for cells, cell lines and tissues of relevance for in vitro systemic toxicity research.
- ToxBank supports the data management and analysis activities carried out across the Alternative Testing Strategies

Data Warehouse

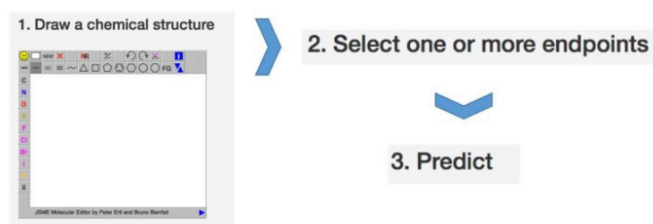
BIO & COMPOUND WIKI

Requires registration



in silico toxicology

Lazy Structure- Activity Relationships) takes a chemical structure as input and provides predictions for a variety of toxic properties. *lazar* uses an automated and reproducible *read across* procedure to calculate predictions. Rationales for predictions, applicability domain estimations and validation results are presented in a clear graphical interface for the critical examination by toxicological experts. *lazar* is built on top of the OpenTox framework.



(DSSTox) Database

DSSTox provides a high quality public chemistry resource for supporting improved predictive toxicology. A distinguishing feature of this effort is the accurate mapping of bioassay and physicochemical property data associated with chemical substances to their corresponding chemical structures.

The ICSS ToxCast Dashboard is an interactive tool for distribution, visualization, and use of chemical screening data from the Toxicity Forecaster (ToxCast) project and the Toxicity Testing in the 21st century (Tox21) collaboration.